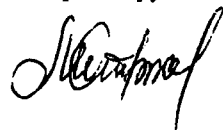


На правах рукописи



ОТРОКОВ МИХАИЛ МИХАЙЛОВИЧ

**Магнитное упорядочение в дискретных
сплавах германия и кремния с
переходными 3d-металлами**

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена на кафедре физики металлов
ГОУ ВПО «Томский государственный университет»

Научный руководитель: кандидат физико-математических наук,
Кузнецов Владимир Михайлович

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Института физики прочности и материаловедения СО РАН,
Мельникова Наталья Васильевна

кандидат физико-математических наук
Эрвье Юрий Юрьевич

Ведущая организация: Институт физики им. Л. В. Киренского СО
РАН, г. Красноярск

Защита состоится 19 мая 2011 г. в 14³⁰ на заседании диссертационного совета Д 212.267.07 при ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке при ГОУ ВПО «Томский государственный университет» по адресу: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 34а.

Автореферат разослан 18 апреля 2011 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.



Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник

Ивонин И. В.

Ивонин

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Магнитные полупроводники на основе кремния, германия или их соединений, легированных магнитными переходными 3d-металлами, привлекают в последние годы большой интерес в качестве новых материалов спиновой электроники (спинтроники). Такие материалы можно, с одной стороны, легко интегрировать в стандартные технологии немагнитных полупроводниковых структур на основе кремния, а, с другой стороны, в них можно реализовать транспорт спин-поляризованных носителей тока. В настоящее время значительное внимание уделяется выращиваемым в форме неупорядоченных сплавов системам состава $\text{Si}_{1-x}\text{Mn}_x$ и $\text{Ge}_{1-x}\text{Mn}_x$, в изучении которых достигнут определенный прогресс. Тем не менее, оптимальные технологии выращивания таких систем еще предстоит найти, поскольку структуры, полученные такими традиционными способами, как ионная имплантация, молекулярно-лучевая эпитаксия или магнетронное напыление, демонстрируют довольно сложную морфологию. В этой связи весьма актуальным становится поиск новых способов получения магнитных полупроводников на основе кремния, германия и их сплавов, а также теоретическое и экспериментальное исследование свойств таких систем.

В данной работе, в рамках первопринципных методов расчета зонной структуры, а также метода Монте-Карло, проведены теоретические исследования электронных свойств и магнитного упорядочения специфического класса магнитных полупроводников – дискретных магнитных сплавов $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}$. Данные сплавы представляют собой сверхтонкие слои переходных металлов $\text{M} = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$ и Ni , периодически внедренные в полупроводниковые пленки $\text{A}^{\text{IV}} = \text{Si}, \text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}, \text{Ge}$. Несмотря на чрезвычайно интересные перспективы, дискретные магнитные сплавы типа $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}$ в экспериментальном плане практически не исследованы. Образование силицидов и германатов переходных металлов в процессе выращивания сплава, судя по всему, пока препятствует получению качественных магнитных слоев в матрицах кремния и германия. В связи с этим основное внимание пока уделяется теоретическому исследованию дискретных магнитных сплавов $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}$ различного состава и структуры [1–8]. Однако, несмотря на значительное количество теоретических исследований, ряд актуальных вопросов до сих пор остается практически незатронутым. В частности, к настоящему времени отсутствуют теоретические оценки критических температур перехода дискретных сплавов в парамагнитное состояние. Кроме того, лишь единичные работы были посвящены исследованию влияния структуры дельта-слоев на магнитные свойства сплавов. Поскольку морфология магнитных слоев критически зависит от использованной методики их получения, важность учета данной морфологии не подлежит сомнению. Наконец, подавляющее большинство теоретических исследований посвящено изучению сплавов типа Si/Mn или Ge/Mn , в то время как другие системы (например, с $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ в качестве матрицы или $\text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Co}$ и Ni в качестве дельта-легирующих элементов) практически не рассматривались.

В целом, сделанный в диссертации выбор практически важных дискретных сплавов и изучение их магнитных и электронных свойств в рамках теории функционала электронной плотности и метода Монте-Карло делает тему диссертации актуальной.

Целью диссертационной работы является комплексное теоретическое исследование магнитных и электронных свойств дискретных сплавов $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}$ и, в частности, сплавов, обладающих ферромагнитным упорядочени-

ферромагнитный сплав Ge/Fe_1 , имеющий высокую спиновую поляризацию на уровне Ферми. В указанных сплавах ферромагнетизм устойчив вплоть до температур порядка 200-240 К.

Положения, выносимые на защиту:

1. Ферромагнитный характер основного состояния дискретных сплавов $\text{A}^{\text{IV}}/\text{MnS}$, где $\text{A}^{\text{IV}} = \text{Si}, \text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}, \text{Ge}$, а слои марганца сформированы по типу замещения. Ферромагнитный характер основного состояния дискретных сплавов Ge/Mn_1 и Ge/Fe_1 , в которых слои марганца и железа сформированы по типу внедрения. Ферромагнитный характер основного состояния дискретного сплава $\text{Si}/\text{Fe}_1\text{Fe}_2$, в котором слои железа сформированы по типу внедрения-замещения. Немагнитный характер основного состояния сплавов $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}_2$, где $\text{M} = \text{Ti}, \text{Co}, \text{Ni}$. Неустойчивость ферромагнитного упорядочения в основном состоянии для всех остальных исследованных сплавов.

2. Особенности электронной структуры дискретных магнитных сплавов типа $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}$ и рассчитанные значения спиновых поляризаций электронных состояний на уровнях Ферми сплавов.

3. Зависимости магнитной восприимчивости, теплоемкости и кумулянтов намагниченности Биндера от температуры, а также оценки характеристических температур магнитного упорядочения в дискретных сплавах типа $\text{A}^{\text{IV}}/\text{M}$.

Достоверность научных результатов и выводов работы достигается корректностью постановки решаемых задач и их физической обоснованностью, применением современных методов расчета, взаимным согласием и непротиворечивостью полученных результатов и выводов, а также качественным и количественным согласием полученных результатов с результатами других теоретических исследований.

Апробация работы. Основные результаты диссертации доложены и обсуждены на следующих конференциях: «Физика и химия высокоэнергетических систем» (Томск, Россия, 2008, 2009 и 2010 гг.), «Актуальные проблемы радиофизики» (Томск, Россия, 2008 г.), «Физика и химия наноматериалов» (Томск, Россия, 2009 г.), «Trends in Magnetism» (Екатеринбург, Россия, 2010 г.), XII Всероссийская молодежная конференция по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, Россия, 2010 г.), «Intermag» (Тайбэй, Тайвань, 2011 г.).

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 11 печатных работах, из них 5 статей в рецензируемых журналах, [A1, A2, A3, A4, A5], 4 статьи в сборниках трудов конференций [A6, A7, A8, A9], и 2 тезисов докладов [A10, A11].

Личный вклад автора. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все основные результаты диссертации получены лично автором.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 220 наименований. Общий объем диссертации составляет 178 страниц, включая 51 рисунок и 6 таблиц.

Содержание работы

Во введении обоснованы актуальность темы диссертации, выбор объектов и методов исследования. Сформулированы цель и задачи работы, перечислены полученные новые результаты, раскрыты их научная и практическая ценность, представлены выносимые на защиту положения, обоснована достоверность результатов, приведен список конференций и семинаров, где результаты диссертации были доложены, а также список печатных работ, где опубликованы основные результаты диссертации.

В первой главе кратко излагаются основы полупроводниковой спинтроники и транспорта спин-поляризованных носителей заряда. Вводится понятие материала для инжекции спин-поляризованных носителей в невырожденные полупроводники. Подробно описывается положение дел в области магнитных полупроводников как материалов для спиновой инжекции, в частности, магнитных полупроводников на основе кремния и германия, являющихся технологически перспективными. Вводится определение дискретных магнитных сплавов как специфической разновидности магнитных полупроводников. Дается подробный обзор экспериментальных и теоретических исследований, имеющихся в отношении дискретных магнитных сплавов кремния и германия с переходными 3d-металлами на сегодняшний день, а также проводится анализ результатов, полученных в данных исследованиях.

Вторая глава посвящена описанию используемой модели дискретных магнитных сплавов и методов их теоретического исследования с приведением конкретных расчетных формул, анализом использованных приближений и описанием параметров, использованных в том или ином методе расчета. Выбор описанных в главе методов обусловлен целью работы и поставленными задачами и является оптимальным. Используемые в работе подход, модели и приближения выбраны на основе предыдущих теоретических исследований, а также с учетом недостатков данных работ.

В разделе 2.1 дается описание используемой модели дискретных сплавов. В разделе 2.2 излагается формализм теории функционала электронной плотности. В разделе 2.3 дается описание метода проекционных присоединенных волн в псевдопотенциальной реализации, используемого для оптимизации атомной структуры дискретных сплавов. Описание подхода к исследованию электронной структуры дискретных сплавов в рамках метода функций Грина дается в разделе 2.4, а в разделе 2.5 излагаются идеи и принципы приближения когерентного потенциала для исследования электронной структуры дискретных сплавов, в которых роль полупроводниковой матрицы играет твердый раствор $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$. В разделе 2.6 обсуждаются результаты расчетов зонных спектров кремния и германия, а также их эквивалентного сплава, проведенных в рамках указанных методов. В рамках модели Хаббарда производится выбор значений потенциала U , при которых достигается наилучшее согласие расчетных значений энергий зон в симметричных точках зон Бриллюэна с экспериментально измеренными значениями. В разделе 2.7 приводится описание магнитной теоремы сил, используемой для расчетов констант межатомных обменных взаимодействий в дискретных сплавах. Приближение разупорядоченных локальных моментов, реализуемое в рамках метода когерентного потенциала и используемое для моделирования парамагнитной фазы в двумерном слое, описывается в разделе 2.8. Наконец, в разделе 2.9 дается описание метода Монте-Карло, применяемого для оценки характеристических температур магнитного упорядочения в дискретных сплавах A^{IV}/M .

В третьей главе представлено исследование внутрислоевого магнитно-

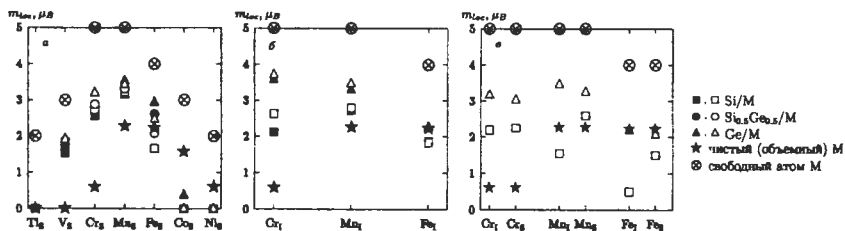


Рис. 1. Рассчитанные значения локальных магнитных моментов m_{loc} атомов переходных металлов в дискретных сплавах A^{IV}/M , содержащих монослой замещения (а), внедрения (б) и внедрения-замещения (в). Значения m_{loc} для релаксированных сплавов показаны светлыми символами, для нерелаксированных сплавов – темными символами. Также показаны значения локальных моментов в чистых (объемных) переходных металлах М и для свободных атомов сорта М.

го упорядочения в дискретных сплавах A^{IV}/M , где $A^{IV} = \text{Si}, \text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}, \text{Ge}$, а $M = \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$ и Ni . Рассмотрены сплавы, состоящие из прослоек A^{IV} толщиной в 7 монослоев и монослоя М, сформированного по типу а) замещения, в котором атомы М замещают один монослой матрицы A^{IV} , б) внедрения, где атомы М внедряются в тетраэдрические междоузлия одного монослоя матрицы A^{IV} и в) замещения-внедрения, который является комбинацией типов а) и б). Излагаются результаты расчетов констант межатомных обменных взаимодействий, произведенных из ферромагнитного (а, в отдельных случаях, из ферримагнитного) состояния в дельта-слоях М. Результаты расчетов обменных параметров сопоставляются с результатами расчетов полных энергий магнитных конфигураций. Анализируются рассчитанные для указанных состояний магнитные спектры.

В разделе 3.1 обсуждаются результаты исследования магнитного упорядочения в дискретных сплавах A^{IV}/M_S , дельта-слои в которых сформированы по типу замещения. Рассчитанные значения локальных магнитных моментов на атомах M_S в A^{IV}/M_S , в среднем, оказались выше, чем в чистых (объемных) переходных металлах (рис. 1а). Это обусловлено тем, что кратчайшие расстояния $d_{M_S-M_S}$ в A^{IV}/M_S существенно превосходят аналогичные расстояния в объемных металлах, сопоставимые с кратчайшими длинами связи $d_{A^{IV}-M_S}$ в рассматриваемых дискретных сплавах. Намагниченность сплавов A^{IV}/CoS неожиданно оказалась равной нулю даже для нерелаксированных структур (за исключением Ge/CoS), в отличие от сплавов ванадия, который в форме свободного атома имеет тот же локальный момент, что и кобальт, но во всех рассмотренных сплавах типа A^{IV}/M_S имеет ненулевой спин. Атомы титана и никеля в составе дискретных сплавов A^{IV}/M_S так же, как и кобальт, не имеют локального момента.

На рисунке 2 показаны рассчитанные для ферромагнитного состояния в сплавах A^{IV}/M_S обменные параметры и спектры спиновых волн. Отрицательность обменных констант J_{01} для сплавов ванадия указывает на выгоду антипараллельной ориентации локальных моментов ближайших соседей в магнитном дельта-слое, что подтверждается расчетами полных энергий.

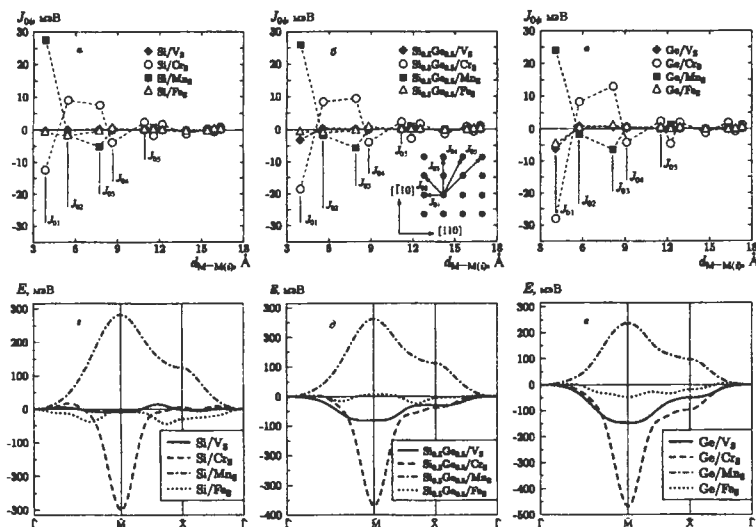


Рис. 2. Рассчитанные для ферромагнитных состояний в дискретных сплавах Si/M₅ (а), Si_{0.5}Ge_{0.5}/M₅ (б) и Ge/M₅ (в) константы межатомных обменных взаимодействий J_{0i} [мэВ] в зависимости от расстояния $d_{Ms-M(i)}$ [Å] между атомом переходного металла и его i -м соседом в монослое. На рисунке (б) изображен δ -слой замещения, стрелками показаны обменные взаимодействия. Рассчитанные для ферромагнитных состояний магнотные спектры сплавов Si/M₅ (з), Si_{0.5}Ge_{0.5}/M₅ (д) и Ge/M₅ (е). Симметричные точки двумерных зон Бриллюэна имеют следующие координаты: $\bar{\Gamma} - (0, 0)$, $\bar{M} - (\pi/a_0^{IV}, \pi/a_0^{IV})$, $\bar{X} - (\pi/a_0^{IV}, 0)$.

Такая нестабильность ферромагнитного состояния проявляется в отрицательных энергиях магновов, означающих наличие энергетически более выгодной спиновой конфигурации, чем ферромагнитная.

В отношении дискретных сплавов хрома типа A^{IV}/Cr₅ получены, на первый взгляд, весьма противоречивые результаты. С одной стороны, спектры спиновых волн указывают на неустойчивость ферромагнитного состояния, а доминирующий обмен между ближайшими соседями определяет тенденцию к антиферромагнитному упорядочению. С другой стороны, согласно расчетам полных энергий, ферромагнитное состояние в сплавах Si/Cr₅ и Si_{0.5}Ge_{0.5}/Cr₅ более выгодно, чем антиферромагнитное. При этом результаты расчетов полных энергий для сплава Si/Cr₅ находятся в качественном согласии с результатами расчетов полных энергий, проведенных в работе [8]. Противоречие между результатами расчетов обменных параметров и результатами расчетов полных энергий исчезает, если допустить, что в сплавах Si/Cr₅ и Si_{0.5}Ge_{0.5}/Cr₅ реализуются сложные, возможно неколлинеарные, спиновые структуры. Энергетическая выгодность антиферромагнитного состояния достигается лишь в Ge/Cr₅, где обменное взаимодействие между ближайшими соседями характеризуется максимальным по модулю отрицательным параметром $J_{01} = -28$ мэВ.

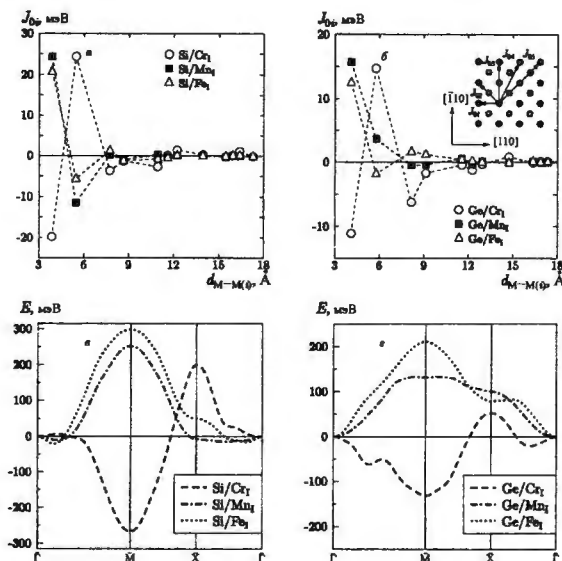


Рис. 3. То же, что и рисунок 2, но для сплавов Si/MnI (а,б) и Ge/MnI (б,з).

Во всех системах с монослоями Mn₂ обменное взаимодействие между ближайшими соседями, характеризующее параметром J_{01} , является существенно ферромагнитным и превалирует над взаимодействиями с атомами последующих координационных сфер. Расчеты полных энергий и магнитных спектров указывают на стабильность ферромагнитного состояния в монослоях Mn₂. Полученные данные находятся в хорошем согласии с результатами предыдущих численных расчетов [3–6, 8].

В системах с монослоями Fe₂ интенсивность обменных взаимодействий весьма незначительна, несмотря на достаточно высокие локальные моменты. Качественно, картины обменных взаимодействий в монослоях Fe₂ различны для различных матриц A^{IV}. Однако, вне зависимости от этого, во всех сплавах A^{IV}/Fe₂ реализуется сложная магнитная структура. Это следует из того, что, несмотря на энергетическую выгодность ферромагнитного состояния по отношению к антиферромагнитному, вид магнитных спектров указывает на неустойчивость ферромагнитной конфигурации.

В разделе 3.2 представлено исследование магнитного упорядочения в дискретных сплавах A^{IV}/M_I (M = Cr, Mn, Fe), дельта-слои в которых сформированы по типу внедрения.

Магнитные моменты атомов переходных металлов в монослоях внедрения имеют величины, близкие к величинам моментов атомов в монослоях замещения (см. рисунок 1б). Для сплавов хрома и марганца с германием (кремнием) величины спиновых моментов несколько выше (ниже), чем в монослоях замещения, в то время как для сплавов железа справедливо противоположное утверждение. Поскольку германий имеет больший параметр

решетки, локальные моменты в его сплавах на $0.4 - 1 \mu_B$ выше, чем в сплавах кремния.

Согласно полученным данным, в дельта-слоях Cr_1 установление ферромагнитного состояния невозможно. Причиной этому является сильное взаимодействие между ближайшими соседями, характеризующее отрицательным параметром J_{01} (рисунки 3а и 3б). Такая обменная связь способствует формированию антиферромагнитной структуры, причем ее ферромагнитные подрешетки стабилизируются интенсивными взаимодействиями с атомами второй координационной сферы. Рассчитанные магнитные спектры сплавов A^{IV}/Cr_1 подтверждают неустойчивость ферромагнитного состояния, поскольку их минимумы находятся не в $\bar{\Gamma}$ -точке (что соответствовало бы устойчивому ферромагнетизму), а в точке \bar{M} (рисунки 3в и 3г). Расчеты полных энергий указывают на выгодность антиферромагнитного состояния в монослоях Cr_1 в обоих матрицах.

Ферромагнитная конфигурация в дискретном сплаве Si/Mn_1 не является спиновой структурой основного состояния, как это было предсказано авторами работы [7] в рамках расчетов полных энергий. Анализ рассчитанных параметров обменных взаимодействий и магнитных спектров позволяет выявить нестабильность ферромагнитного состояния по отношению к формированию спиральной спиновой структуры. Данная нестабильность возникает вследствие существенного обмена, характеризующего отрицательным параметром J_{02} и происходящего посредством электронов принадлежащего плоскости δ -слоя атома кремния Si_0 (рисунок 3). Монослой Mn_1 в германиевой матрице демонстрирует устойчивый ферромагнитный порядок. Магнитный спектр данного сплава имеет минимум в точке $\bar{\Gamma}$, что означает коллинеарную ферромагнитную спиновую структуру в дельта-слое (рисунок 3г). Аналогичная ситуация наблюдается для сплавов типа A^{IV}/Fe_1 .

В разделе 3.3 представлено исследование магнитного упорядочения в дискретных сплавах A^{IV}/M_1M_2 ($M = Cr, Mn, Fe$), дельта-слои в которых сформированы по типу внедрения-замещения. В монослое внедрения-замещения атомы M_1 и M_2 имеют различные атомные окружения и поэтому их магнитные моменты неравны (см. рисунок 1г). Вследствие этого обменные взаимодействия в соответствующих подрешетках различны.

Ферромагнитное состояние в монослоях Cr_1Cr_2 крайне неустойчиво, поскольку подрешетки внедрения и замещения стремятся упорядочиться в противоположных направлениях 4а. Параметры взаимодействий внутри подрешеток еще более усиливают тенденцию к формированию такой ферромагнитной структуры. Для сплава Ge/M_1M_2 данное предположение подтверждается расчетами полных энергий. Что касается сплава Si/M_1M_2 , то, поскольку нам не удалось достигнуть самосогласования зарядовой плотности для ферромагнитной конфигурации, сравнение полных энергий ферромагнитной и ферромагнитной спиновых структур оказалось невозможным.

В магнитных слоях дискретного сплава Si/Mn_1Mn_2 ферромагнитное упорядочение нестабильно. Как видно из рисунка 4б, причиной данной нестабильности являются взаимодействия между ближайшими соседями в подрешетке внедрения, характеризующиеся параметрами $J_{02}^{I1} = -9.9$ мэВ. При этом взаимодействием между подрешетками нельзя пренебречь. Очевидно, спиновая структура в магнитных дельта-слоях сплава Si/Mn_1Mn_2 является сложной, причем не исключена возможность формирования неколлинеарных со-

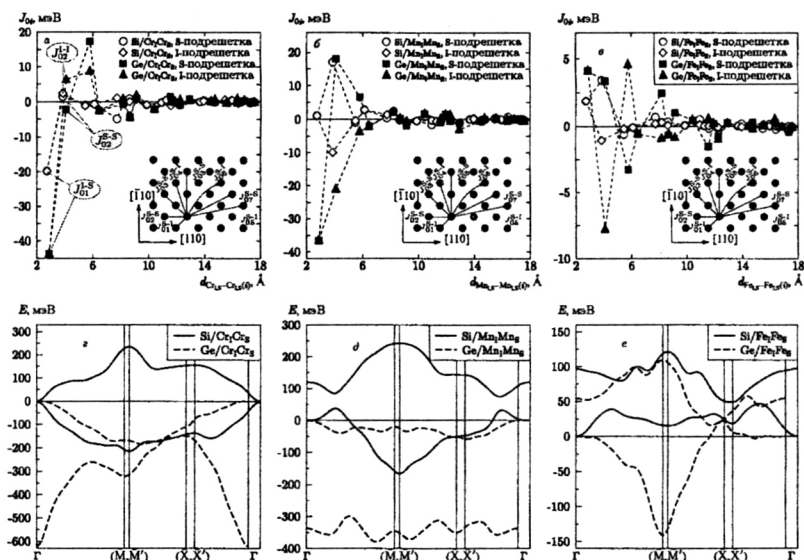


Рис. 4. То же, что и рисунок 2, но для сплавов A^{IV}/Cr_1Cr_2 (a,z), A^{IV}/Mn_1Mn_2 (б,д) и A^{IV}/Fe_1Fe_2 (в,е). Для сплава Si/Cr_1Cr_2 обменные параметры и магнитные спектры представлены для ферромагнитного состояния в дельта-слоях.

стояний. В смешанных монослоях дискретного сплава Ge/Mn_1Mn_2 взаимодействие между атомами Mn_1 и Mn_2 , являющимися ближайшими соседями в дельта-слое, задает тенденцию к намагничиванию соответствующих подрешеток в противоположных направлениях. Выгодность такой ферромагнитной структуры по сравнению с ферромагнитной подтверждается расчетами полных энергий.

Смешанный монослой Fe_1Fe_2 в кремнии демонстрирует стабильные ферромагнитные свойства, возникающие вследствие обменной связи между ближайшими соседями в подрешетке замещения ($J_{02}^{S-S} = 3.42$ мЭВ), а также ферромагнитного взаимодействия между подрешетками ($J_{01}^{I-S} = 1.86$ мЭВ).

Согласно расчетам обменных параметров, в дельта-слоях дискретного сплава Ge/Fe_1Fe_2 магнитная структура является сложной и определяется конкуренцией взаимодействий между подрешетками и взаимодействий внутри подрешеток. Расчеты полных энергий свидетельствуют о том, что спиновая конфигурация, в которой подрешетка замещения упорядочена ферромагнитно, а подрешетка внедрения – антиферромагнитно, более выгодна, чем конфигурация с намагниченными в одном направлении подрешетками. Однако, магнитный спектр, рассчитанный для энергетически выгодной конфигурации, свидетельствует о ее нестабильности. Вопрос о магнитном упорядочении в данном монослое далее не исследовался, поскольку не исключена возможность формирования неколлинеарных структур, изучение которых представляет собой отдельную задачу.

Таблица 1. Характеристики электронных спектров и спиновые поляризации на уровнях Ферми, P [%], ферромагнитных дискретных сплавов A^{IV}/M . Для ферромагнитных полуметаллов указан размер энергетической щели.

Матрица	Si		Ge		
Структура монослоя M	Mn ₅	Fe ₁ Fe ₈	Mn ₅	Mn ₁	Fe ₁
Хар-р электр. спектра	полумет., 200 мэВ	мет.	полумет., 300 мэВ	мет.	мет.
P	100	50	100	48	80

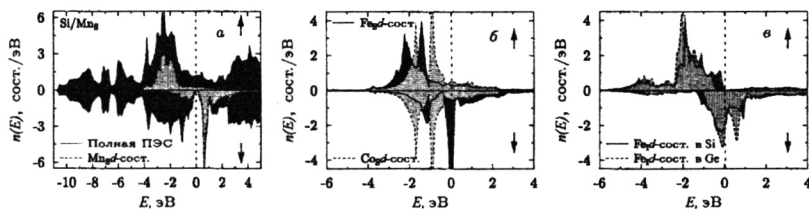


Рис. 5. а) Полная ПЭС и парциальная Mn_{5d} -ПЭС для сплава Si/Mn₅, б) парциальные Fe_{8d} - и Co_{8d} -ПЭС для сплавов Si/Fe₈ и Si/Co₈, в) парциальные Fe_{1d} -ПЭС для сплавов Si/Fe₁ и Ge/Fe₁.

В четвертой главе излагаются результаты исследования электронных свойств дискретных магнитных сплавов. Приводятся результаты расчетов полных (на сверхячейку) плотностей электронных состояний (ПЭС), а также локальных ПЭС атомов M и атомов A^{IV} (послойно), разложенных на парциальные s -, p - и d -составляющие. Для ферромагнитных систем определяются спиновые поляризации на уровнях Ферми. С целью установления характерных особенностей зонной структуры и выявления закономерностей ее влияния на магнитное упорядочение, электронные свойства всех остальных, т.е. не ферромагнитных, дискретных сплавов обсуждаются для наиболее энергетически выгодных спиновых конфигураций (из рассмотренных коллинеарных) в дельта-слоях переходных металлов M.

Несмотря на то, что дискретные магнитные сплавы типа A^{IV}/M относят к классу магнитных полупроводников, по характеру зонной структуры данные сплавы являются металлами (либо ферромагнитными полуметаллами, таблица 1). Электронные спектры дискретных магнитных сплавов содержит как сильно коррелированные узкие, так и слабо коррелированные широкие зоны. Вследствие этого достаточно сложно разделить зонный спектр этих систем на ряд четко выраженных энергетических полос (см. рисунок 5). Фактически, можно выделить низкоэнергетическую часть спектра (от -11 до -4 эВ), сформированную s - и p -состояниями атомов A^{IV} , среднюю часть спектра (от -4 до -1 эВ), электронно-энергетическое строение которой формируют как гибридные A^{IV} - p - M - d -состояния, так и негибридные A^{IV} - p -состояния, и прифермиевскую область, ширина которой достаточно условна, а форма профи-

ля ПЭС существенно зависит от дельта-легирующего элемента и структуры магнитного дельта-слоя.

Зонные спектры дискретных сплавов A^{IV}/Mn имеют полуметаллический характер (таблица 1 и рисунок 5а). Возникновение полуметаллического состояния, характеризуемого металлической проводимостью в подсистеме со спином вверх и полупроводниковой проводимостью в подсистеме со спином вниз, понижает полную энергию системы и стабилизирует ферромагнитный порядок в дельта-слое.

Отсутствие локальных моментов на атомах Co и Ni в дискретных сплавах типа A^{IV}/M_S , о котором говорилось в главе 3, находит качественное объяснение в рамках модели жесткой зоны. При переходе от Fe к Co энергетически выгодным оказывается такое смещение ПЭС n_{\uparrow} и n_{\downarrow} , при котором d_{\uparrow} -состояния незначительно «поднимаются» по энергии, а узкий пик d_{\downarrow} -состояний опускается в валентную зону (рисунок 5б). Именно таким образом происходит гашение локальных моментов в дискретных сплавах типа A^{IV}/Co_S .

Выше сообщалось, что при увеличении содержания германия в матрицах дискретных сплавов A^{IV}/M_I , ферромагнитное упорядочение в дельта-слоях $M_I = Mn, Fe$ стабилизировалось по отношению к формированию неколлинеарных структур. Как видно на рисунке 5б, факторами, обуславливающими данную стабилизацию, могут являться усиление обменного расщепления d -состояний металла M, а также локализация этих состояний (сужение зон), обеспечивающие выигрыш в энергии.

Гибридизация в дискретных магнитных сплавах, в целом, носит достаточно сложный характер. Лишь в системах с незначительными структурными релаксациями гибридизация происходит строго в соответствии с симметриями орбиталей, определяемыми тетраэдрическим окружением структуры алмаза. Отметим, что с целью улучшения описания зонной структуры объемных полупроводников A^{IV} вблизи уровня Ферми, для их p -состояний был дополнительно введен потенциал Хаббарда U . Наличие данного потенциала весьма слабо влияет на структурные свойства изучаемых дискретных сплавов, но, в то же время, влияет на A^{IV} - p - M - d гибридизацию, и приводит к более корректному определению магнитных моментов, констант межатомных обменных взаимодействий и характеристических температур. Таким образом, корректное описание электронной структуры проводника оказывается важным для корректного количественного и качественного описания магнитных свойств дискретных сплавов. Как было отмечено выше, гибридные состояния играют существенную роль в посредничестве обменных взаимодействий между локальными моментами магнитного слоя.

Пятая глава посвящена оценке характеристических температур магнитного упорядочения дискретных сплавов A^{IV}/M в рамках метода Монте-Карло.

Коррелированные длинноволновые флуктуации параметра порядка играют важную роль вблизи критической точки. В методе Монте-Карло флуктуации намагниченности являются некоррелированными и поэтому оцененные в рамках данного метода температуры соответствуют не критическим, а *характеристическим температурам* магнитного упорядочения. Согласно теореме Мермина-Вагнера [9], длинноволновые спиновые флуктуации разрушают магнитный порядок в двумерной изотропной Гейзенберговской системе при конечной температуре. В данной работе учет магнитной анизотропии, присутствующей в любой двумерной магнитной системе, был произведен фе-

номенологически при помощи введения в гамильтониан Гейзенберга анизотропного члена

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j - \sum_i \Delta (e_i^z)^2, \quad (1)$$

где z определяет направление легкой оси намагниченности (либо нормаль к «лёгкой» плоскости), а Δ – энергия магнитной анизотропии. Так как точные значения Δ для ДМС A^{IV}/M неизвестны, данная величина была введена как параметр. В случае анизотропии типа легкая ось ($\Delta > 0$) влияние длинноволновых спиновых флуктуаций на магнитный порядок не существенно в силу чего характеристическую температуру магнитного упорядочения можно качественно связать с критической температурой. В случае легкоплоскостной анизотропии ($\Delta < 0$) длинноволновые спиновые флуктуации разрушают дальний порядок при $T > 0$. Оцененная в рамках метода Монте-Карло температура в этом случае соответствует *температуре кроссовера* и переходу в режим Березинского-Костерлица-Таулеса.

Оценки характеристических температур проводилась при помощи расчетов температурных зависимостей магнитной восприимчивости χ , теплоемкости C и кумулянтов Биндера U_L :

$$\chi = \frac{N}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2), \quad (2)$$

$$C = \frac{N}{k_B T^2} (\langle E_{\text{вн}}^2 \rangle - \langle E_{\text{вн}} \rangle^2), \quad (3)$$

$$U_L = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle_L}{3 \langle M^2 \rangle_L^2}, \quad (4)$$

где k_B – постоянная Больцмана, N – число магнитных узлов, $E_{\text{вн}}$ – внутренняя энергия системы, M – решеточная (либо шахматная) намагниченность, а угловые скобки обозначают усреднение по ансамблю.

Результаты расчетов свидетельствуют, что межслоевая обменная связь при толщине полупроводниковой прослойки в семь монослоев практически отсутствует и, следовательно, отсутствует магнитное упорядочение между соседними слоями. Для рассматриваемого на рисунке 6 сплава Ge/FeI скачкообразные изменения магнитной восприимчивости и теплоемкости наблюдается при температурах порядка 240-250 К. Наиболее точно значение критической

Таблица 2. Критические температуры T_C [K] перехода дискретных сплавов A^{IV}/M в парамагнитное состояние, оцененные для случая анизотропии типа легкая ось, при значении $\Delta = 0.5$ [мэВ] исходя из парамагнитного состояний в дельта-слоях M.

A^{IV}	V_S	Cr_S	Cr_I	Cr_ICr_S	Mn_S	Mn_I	Mn_IMn_S	Fe_S	Fe_I	Fe_IFe_S
Si	188	125	372	328	196	28	170/250	12	215	106
Ge	280	240	338	342	208	192	280	98	240	72/162

сплавов A^{IV}/V_S и Ge/Cr_S реализуется антиферромагнитная конфигурация. Сплавы титана, кобальта и никеля являются немагнитными для всех рассмотренных полупроводниковых матриц. Для всех остальных сплавов обнаружена тенденция к формированию более сложных, возможно неколлинеарных, спиновых структур.

б) В системах Si/Mn_I и Si/Fe_I реализуются спиральные спиновые структуры, в то время как в сплавах Ge/Mn_I и Ge/Fe_I обнаружен стабильный внутрислойный ферромагнетизм. Сплавы Si/Cr_I и Ge/Cr_S в основном состоянии упорядочиваются антиферромагнитно.

в) Дискретный сплав $Si/Fe_I Fe_S$ упорядочивается ферромагнитно. Сплавы $A^{IV}/Cr_I Cr_S$, $A^{IV}/Mn_I Mn_S$ и $Ge/Fe_I Fe_S$ обладают сложными, возможно неколлинеарными, спиновыми структурами.

2. Проведено систематическое первопринципное исследование электронной структуры в дискретных сплавах типа A^{IV}/M , где $A^{IV} = Si, Si_{0.5}Ge_{0.5}, Ge$, а $M = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni$, в зависимости от атомной структуры монослоя M . В рамках модели жесткой зоны интерпретированы электронные спектры серии дискретных магнитных сплавов типа A^{IV}/M_S и объяснено отсутствие намагниченности сплавов Ti, Ni и Co . Показано, что сплавы типа A^{IV}/M_S являются ферромагнитными полуметаллами с величиной щели, варьирующейся между 200 и 300 мэВ. Сплавы $Ge/Fe_I, Ge/Mn_I$ и $Si/Fe_I Fe_S$ обладают спиновыми поляризациями на уровнях Ферми, превышающими 50 %. Стабилизация ферромагнитного порядка при увеличении концентрации германия в матрицах сплавов A^{IV}/Mn_I и A^{IV}/Fe_I может быть обусловлена усилением обменного расщепления и локализацией d - состояний, обеспечивающие выигрыш в энергии.

3. Впервые выполнены оценки характеристических температур магнитного упорядочения в дискретных сплавах типа A^{IV}/M с учетом магнитной анизотропии. Обнаружено, что межслойная обменная связь при толщине прослойки в 7 атомных слоев слишком слаба для того, чтобы обеспечить межслойное магнитное упорядочение при температурах выше 0 К. Таким образом, оцененные характеристические температуры соответствовали температурам внутрислоевого упорядочения. Показано, что в случае анизотропии типа легкая ось величины температур Кюри для дискретных ферромагнитных сплавов A^{IV}/M могут достигать 200-240 К. По самым оптимистичным оценкам, температуры Кюри ферромагнитных сплавов Ge/Mn_I и Ge/Fe_I достигают комнатной температуры. Для ряда сплавов хрома оцененные значения критических температур существенно превышают комнатную температуру. Рекордная критическая температура наблюдается в антиферромагнитном сплаве $Si/Cr_I - 372$ К. В целом, критические температуры перехода в парамагнитное состояние для сплавов германия выше, чем для сплавов кремния. В случае анизотропии типа легкая плоскость, описываемой в рамках XY -модели, магнитное упорядочение отсутствует при температурах выше 0 К. Оцененные температуры кроссовера, ниже которых система находится в режиме степенного убывания спинового коррелятора (режим Березинского-Костерлица-Таулеса), имеют величины, близкие к величинам критических температур в случае анизотропии типа легкая ось.

Список публикаций

- A1. Отроков М. М., Кузнецов В. М. Исследование ферромагнитных гетероструктур на основе кремния // Известия Вузов. Физика. 2008. Т. 9, № 2. С. 200–203.
- A2. Отроков М. М., Кузнецов В. М. Дискретные магнитные гетероструктуры на основе дельта-легированного железом кремния // Известия Вузов. Физика. 2009. Т. 12, № 2. С. 92–95.
- A3. Отроков М. М., Останин С. А., Ernst A. и др. Дискретные магнитные гетероструктуры на основе Si и Fe // Физика Твердого Тела. 2010. Т. 52, № 8. С. 1563–1569.
- A4. Otrokov M. M., Ernst A., Ostanin S. et al. Intralayer magnetic ordering in Ge/Mn digital alloys // Phys. Rev. B. 2011. — Apr. Vol. 83, no. 15. Pp. 155203–1–155203–6.
- A5. Отроков М. М., Тугушев В. В., Эрнст А. и др. Магнитное упорядочение в дискретных сплавах полупроводников IV группы с переходными 3d-металлами // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 2011. Т. 139, № 4. С. 720–732.
- A6. Отроков М. М. Магнитное упорядочение в дискретных сплавах полупроводников IV группы с переходными 3d-металлами // Сборник материалов IV Международной конференции «Физика и химия высокоэнергетических систем», Томск, Томский Государственный Университет, 2008. Томск: 2008. С. 114–118.
- A7. Отроков М. М. Релаксации в кремниевых цифровых ферромагнитных гетероструктурах в зависимости от типа монослоя марганца // Сборник материалов V Международной конференции «Физика и химия высокоэнергетических систем», Томск, Томский Государственный Университет, 2009. Томск: 2009. С. 162–166.
- A8. Отроков М. М. Дискретные магнитные гетероструктуры на основе Si и Fe // Сборник материалов II Международной конференции «Физика и химия наноматериалов» / Томский Государственный Университет. Томск: 2009. С. 104–109.
- A9. Отроков М. М., Кузнецов В. М. Магнитные свойства дискретных магнитных гетероструктур на основе Si и Mn в зависимости от типа монослоя Mn и толщины прослойки Si // Сборник материалов VI Международной конференции «Физика и химия высокоэнергетических систем» / Томский Государственный Университет. Томск: 2010. С. 32–35.
- A10. Otrokov M. M., Ernst A., Ostanin S. et al. Si-based digital magnetic alloys: magnetic ordering versus type of Mn delta-doping layer // Proceedings of IV Euro-Asian Symposium „Trends in MAGnetism“ EASTMAG-2010 / Institute of Metal Physics UB RAS. Ekaterinburg: 2010. P. 34.

- A11. Отроков М. М., Кузнецов В. М. Внутрислойное магнитное упорядочение в дискретных сплавах Ge с Mn // Тезисы XII Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и полупроводниковой опто- и наноэлектронике / Санкт-Петербургский Государственный Политехнический Университет. Санкт-Петербург: 2010. С. 16.

Цитированная литература

1. Меньшов В. Н., Тугушев В. В. Межслойная обменная связь в дискретных магнитных сплавах ферромагнетик-полупроводник // Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики. 2008. Т. 133. С. 1070–1081.
2. Caprara S., Tugushev V. V., Echenique P. M., Chulkov E. V. Half-metallic behavior of a ferromagnetic metal monolayer in a semiconducting matrix // Europhys. Lett. 2009. Vol. 85, no. 2. Pp. 27006–1–27006–5.
3. Continenza A., Antonietta F., Picozzi S. Ferromagnetism and carrier confinement in Mn/Ge digital alloys // Phys. Rev. B. 2004. — Jul. Vol. 70, no. 3. Pp. 035310–1–035310–11.
4. Picozzi S., Ležaić M., Blügel S. Electronic structure and exchange constants in magnetic semiconductor digital alloys: chemical and band-gap effects // Phys. Stat. Solidi A. 2006. — Sep. Vol. 203, no. 11. Pp. 2738–2745.
5. Wang H. Y., Qian M. C. Electronic and magnetic properties of Mn/Ge digital ferromagnetic heterostructures: An ab initio investigation // J. Appl. Phys. 2006. — Apr 15. Vol. 99, no. 8. Pp. 08D705–1–08D705–3.
6. Qian M. C., Fong C. Y., Liu K. et al. Half-Metallic Digital Ferromagnetic Heterostructure Composed of a δ -Doped Layer of Mn in Si // Phys. Rev. Lett. 2006. — Jan. Vol. 96, no. 2. Pp. 027211–1–027211–4.
7. Wu H., Kratzer P., Scheffler M. Density-Functional Theory Study of Half-Metallic Heterostructures: Interstitial Mn in Si // Phys. Rev. Lett. 2007. — Mar. Vol. 98, no. 11. Pp. 117202–1–117202–4.
8. Uspenskii Y. A., Kulatov E. T. Ab initio calculation and analysis of the properties of digital magnetic heterostructures and diluted magnetic semiconductors of IV and III-V groups // J. Magn. Magn. Mat. 2009. — Apr. Vol. 321, no. 7. Pp. 931–934.
9. Mermin N. D., Wagner H. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models // Phys. Rev. Lett. 1966. — Nov. Vol. 17, no. 22. Pp. 1133–1136.

102